



TITLE:

# 一次元Mott絶縁体のZener破壊(基 研研究会 確率モデルの統計力学,研 究会報告)

AUTHOR(S):

岡, 隆史

---

CITATION:

岡, 隆史. 一次元Mott絶縁体のZener破壊(基研研究会 確率モデルの統計力学,研究会報告). 物性研究 2004, 82(2): 300-309

ISSUE DATE:

2004-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/97803>

RIGHT:

# 一次元 Mott 絶縁体の Zener 破壊

岡 隆史 \*  
東大理 物理

## 1 Introduction

電子系の輸送問題は基礎物理としての興味、産業的重要性から精力的に研究されてきた。系の輸送特性を大きく変化させる要因としては電子相関 (Mott 絶縁体)、不純物散乱 (Anderson 局在) などが知られている。特に電子相関の理論は銅酸化物高温超伝導体の発見を契機に、1990 年代に体系的に整備され、一次元系の場合は、基底状態のみならず励起状態に関しても理解が進んできた。

近年、ac, dc 電場といった流れを駆動、補助するような外場の効果が注目を浴びるようになった ([1, 2] など)。一次元物質の Mott 絶縁体転移 [3] は電子相関と輸送の関わりを議論する上で最も基本的な問題であるが、線形応答理論を越えた非平衡系の理解は未だ途上にある。これまでの理論研究としては、電場によって引き起こされる非断熱遷移を考察するもの [4] や、流れを誘起するような項をハミルトニアンに導入し、Bethe 仮説を用いて励起ギャップの変化を調べるもの [5, 6] などがある。本解説では [4] に基づき、一次元電子系への非断熱遷移の影響を数値解析と理論解析を交えて述べる。

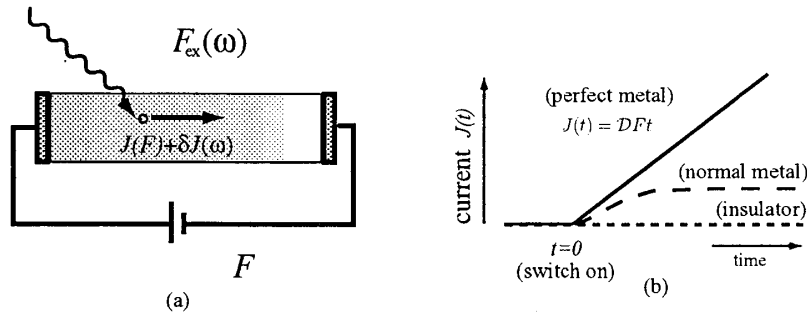


Figure 1: (a) 静電場  $F$  の元での輸送、光応答。(b) 無限系で予想される電流の流れ方。

線形応答理論の範囲内では、絶縁体に静電場  $F$  をかけても電流が流れることはない。これは、基底状態 (最低エネルギー状態) と励起状態との間のエネルギーギャップ  $\Delta$  のためである。しかし、電場が十分大きい場合、エネルギーギャップ  $\Delta$  を越えた量子非断熱遷移 (Landau-Zener 遷移) が生じ、電流が流れる。遷移確率  $p$  は電場  $F$  に非解析的に依存し [7]、

$$p = \exp\left(-\pi \frac{\bar{F}}{F}\right), \quad \bar{F} \equiv \frac{\Delta^2}{D_{TL}a} \quad (1)$$

となる。 $a$  は格子定数、 $D_{TL}$  は朝永=Luttinger 液体の輸送係数 (charge stiffness) である。非断熱遷移の起こる目安である臨界電場  $\bar{F}$  は、現実的な物質 ( $\Delta \sim 1\text{eV}$ ) で、 $\bar{F} \sim 10^9 \sim 10^{10} \text{eV/m}$  程度となる (絶対0度)。

以下では

1. Kohn による金属絶縁体転移の理論の非断熱遷移への拡張。
2. Mott 絶縁体の絶縁破壊現象とバンド絶縁体の破壊現象の違い (multi gap 効果)。

の二点に重点を置いて説明する。

\*oka@cms.phys.s.u-tokyo.ac.jp

## 2 Kohn の判定条件と Mott 絶縁体

電子系の輸送特性を理解する上で Drude weight (輸送係数) と Kohn の判定条件は基本的なものである。Drude weight <sup>1</sup>  $D$  がゼロでない金属 (完全金属) に静電場  $F$  をかけると、

$$J(t) = DFt, \quad \text{温度ゼロ} \quad (2)$$

のように電流値はどんどん増大する (図 1(b))。ところが、ウムクラップ散乱、フォノン散乱、に代表される非弾性散乱 (電子系の運動量保存則を破る散乱過程) が存在する場合、 $D$  は変化する。Drude weight  $D$  は基底状態のエネルギーの磁束による変化  $E_0(\Phi)$  を調べることで求められる (Kohn [8])。

$$D = L \lim_{\Phi \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial \Phi^2} E_0(\Phi) \quad (3)$$

Kohn の判定条件とは、このようにして計算した Drude weight がゼロの値で金属絶縁体転移を判断するものである。

$$D \neq 0 \leftrightarrow \text{perfect metal}, \quad D = 0 \leftrightarrow \text{insulator} \quad (4)$$

**一次元 Hubbard モデルと絶縁体転移** ここでは一次元 Hubbard モデル (half-filled) を考える。このモデルは格子の上で定義された spin を持つ電子のモデルであり、ハミルトニアンは

$$H(\Phi) = -\frac{W}{4} \sum_{i,\sigma} \left( e^{2\pi i \Phi / N} c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (5)$$

で与えられる。電子二個が同じサイトに有ると斥力  $U$  を感じる (図 2)。このため、half-filled (各サイトあたりに電子が一つずつ存在) では、基底状態は絶縁体となり [3]、電荷励起にギャップ (Mott ギャップ) を持つ。

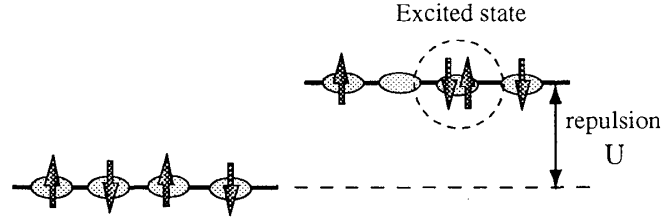


Figure 2: 電子間斥力  $U$ 。電子の追い越しに  $U$  のペナルティー。

磁束  $\Phi$  を変化させるとハミルトニアン  $H(\Phi)$  の固有エネルギーは変化する。こうして得られる断熱スベクトルは相互作用  $U$  の有無で大きく異なる (図 3)。  $U$  がある場合、準位反発が数多くの場所で起きる。図 3(c) の一番下のギャップは基底状態と 2string 状態の間のギャップであり、熱力学極限  $L \rightarrow \infty$  で Mott ギャップに収束する [9]。このギャップのため、基底状態のエネルギー  $E_0(\Phi)$  は熱力学極限  $L \rightarrow \infty$  で  $\Phi$  依存性が消える i.e.,

$$D = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\partial^2 E_0(\Phi)}{\partial \Phi^2} = 0 \quad (6)$$

よって Kohn の判定条件からも一次元 half-filled Hubbard モデルが絶縁体であることが確認できる。

**Kohn の判定条件の不満な点** Kohn の判定条件では完全金属と絶縁体しか区別できない。有限の電場  $F$  をかけた場合、

$$J(t) \rightarrow \text{const.} \quad (7)$$

のように電流値が一定値に落ち着く場合 (図 1(b)) や、その他の振る舞いも当然考えられる。Kohn の判定条件の下では絶縁体 ( $D = 0$ ) であるような系でも、十分大きな静電場  $F$  をかけると電流が流れる。その場合、静電場の大きさに応じて 絶縁体  $\rightarrow$  金属  $\rightarrow$  完全金属 と電流の流れ方が変化していくように見える [4]。以下では一次元 Mott 絶縁体の静電場による insulator-to-metal transition を見ていく。

<sup>1</sup>Drude weight  $D$  は電気伝導度  $\sigma(\omega)$  の実部の  $\omega \rightarrow 0$  で発散する成分と関係している;  $\text{Re}\sigma(\omega) = D\delta(\omega) + \sigma_{\text{reg}}(\omega)$ 、ここで、 $\sigma_{\text{reg}}(\omega)$  は発散しない成分。電気伝導度の久保公式、

$$\sigma(\omega) = \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\lambda e^{i(\omega + i\delta)t} \langle J(-i\hbar\lambda) J(t) \rangle$$

を用いても  $D$  を計算できるが、一般には困難である。Kohn の判定法では基底の断熱スペクトルのみが必要で、計算は容易になる。

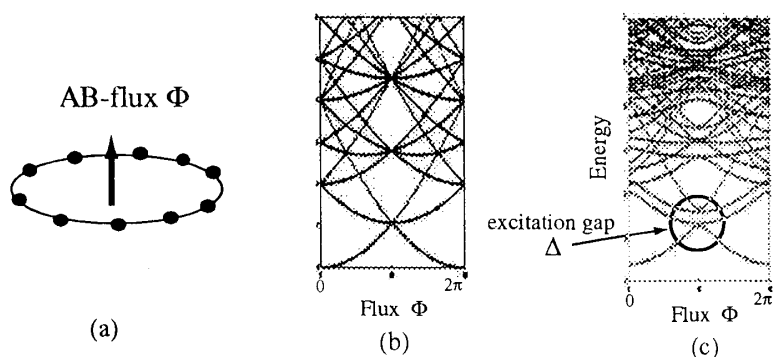


Figure 3: (a)AB-磁束  $\Phi$  (b) $U = 0$  の Hubbard モデルの断熱スペクトル。準位交叉が起きている。(c) $U = 1$  の Hubbard モデルの断熱スペクトル。いたるところで準位反発が起きている。一番下の丸印の準位反発のせいで、絶縁体転移が起きる ( $D \rightarrow 0$ )。 (b), (c) 共に 6 サイト系である。なお、Hubbard モデルでは断熱スペクトルは  $\Phi \sim \Phi + 2\pi$  の周期性を持つ。

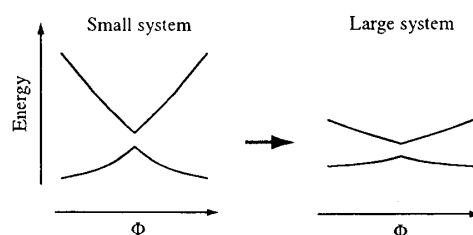


Figure 4: サイト数を増やした時の断熱スペクトルの変化 (イメージ図)。ギャップのために基底状態の  $\Phi$  依存性が変化し、系は絶縁体となる。

### 3 1次元 Mott 絶縁体の絶縁破壊 — 多体 Zener 機構

一次元銅酸化物  $\text{SrCuO}$  は代表的な Mott 絶縁体である。この物質に静電場をかけ、絶縁破壊を測定する実験が行われた [1]。その結果、臨界電場  $F$  以上の電場をかけると絶縁性が破壊されることが、そして、電場の温度依存性から現象が量子論的 (トンネル現象) なものであることが明らかになった。さらに、非線形光学効果の実験より、バンド絶縁体と比較して励起後の緩和が劇的に早いことが知られている [10]。これは多体効果が何らかの散逸効果をもたらしていることを示唆する。

#### 3.1 時間依存 Schrödinger 方程式

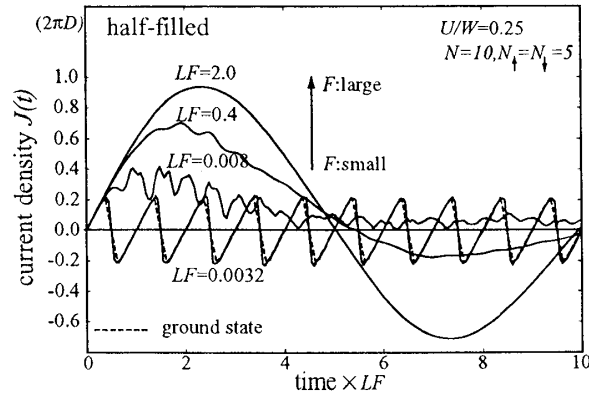
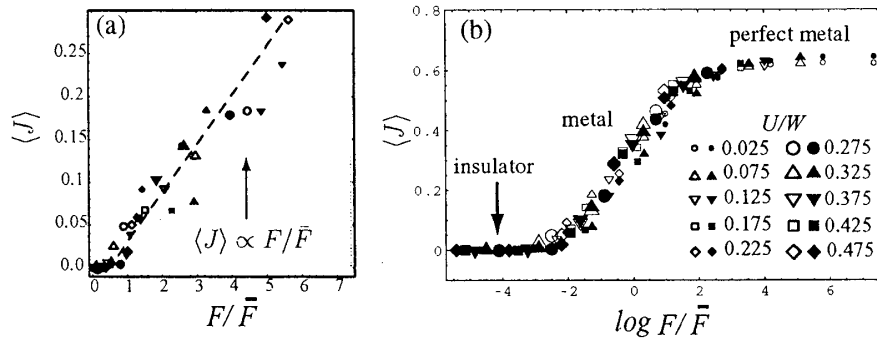
静電場  $F$  の元での Hubbard モデルの振る舞いは次の時間依存シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(\Phi(t)) |\psi(t)\rangle \quad (8)$$

によって記述される。ただし、AB-磁束による位相の変化は  $\Phi(t) = FLt/\hbar$  で与えられる。この時、電流値の時間変化を追うと図5のようになる。ただし、電流値はカレント演算子  $J(t) \equiv -\sum_{i,\sigma} \left( ie^{2\pi i \Phi(t)/N} c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \text{h.c.} \right)$  の期待値である。さらに、より定量的な振る舞いを見るために電流の時間平均  $\langle J \rangle$  を求めた (図6)。ただし、 $\langle J \rangle$  は完全金属の時に発散しないように  $\langle J \rangle = \int_0^{\Delta t} J(t) dt / \Delta t$  ( $LF\Delta t = N\Phi_0/4$ ) によって定義した。図5、6より、電流の流れ方は電場  $F$  の強さに応じて、おおよそ次の3通りに分類できることが分かる。

- (1) 弱電場;  $\langle J \rangle = 0$  "絶縁体" 周期  $\Delta\Phi = 1$  のギザギザ。これは電流の AB 振動という現象で、小さな系においてみられるものである。電流を時間平均すると 0 になる。線形応答理論 (Kohn の判定条件) で予想される通り絶縁体である。
- (2) 中間;  $\langle J \rangle \propto F$  "散逸のある金属" 図中の  $LF = 0.008$  のデータがそうである。この時、電流は激しく振動<sup>2</sup>し、有る一定値に近づくように見える。この振動の由来は非断熱遷移 (Landau-Zener 遷移)

<sup>2</sup> メゾ系の実験でこの振動の様子を測定することが可能かも知れない。

Figure 5: 静電場下 Hubbard モデルの電流値  $J(t)$  の時間発展。Figure 6: "IV" 特性。横軸は Landau-Zener 理論に基づいて臨界電場  $\bar{F}$  によってスケールしている。(a) は電場の弱い領域をプロット。(b) では全体を  $\log F/\bar{F}$  に対してプロット。なお、(a),(b) とも 6(白印)、8(黒印) サイトの half-filled Hubbard モデルを解いた結果である。

である。有限サイズ効果であり確かなことは言えないが、電圧  $V = LF$  と電流  $\langle J \rangle$  の間に

$$V = \langle J \rangle R \quad (9)$$

という Ohm 則のような振る舞いが見える。ただし、 $R = \alpha L\bar{F}$  は臨界電場  $\bar{F}$  と TL 液体の輸送係数から決まる"多体相関による電気抵抗"である。 $\alpha$  はモデルの詳細に依存する比例定数である。

- (3) 強電場;  $\langle J \rangle = 4D_{TL}$  "完全金属" この時電流は  $J(t) = 2\pi D_{TL} \sin(FLt/\hbar)$  のよう振る舞う。サイト数 ( $L = 10$ ) と同じ周期  $\Delta\Phi$  の緩やかな振動をするが、これは拡張 AB 周期と呼ばれる有限系特有の現象である。非常に高いエネルギーを持っており不安定、実験的に見るのは難しいであろう。

以下ではこのような電流の振る舞いのクロスオーバーを量子非断熱遷移という立場から見ていく。

### 3.2 量子非断熱遷移と Landau-Zener 理論

時間に依存するハミルトニアンを持つ系を考察する場合、前節で登場した断熱スペクトルが重要な役割を果たす。時間依存 Schrödinger 方程式の解は、エネルギー準位を軌道として持つ多粒子系の時間発展の問題と等価である。実際、波動関数を基底  $|M(\Phi)\rangle$ ,  $M = (e, m; \{n_i\}, \{\bar{n}_i\})$  を用いて  $|\psi(t)\rangle = \sum_M a_M(t) |M(\Phi(t))\rangle$  と展開すると、時間依存 Schrödinger 方程式 (8) は

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_M = E_M a_M + \sum_{M'} \dot{\Phi} A_{MM'} a_{M'}, \quad \dot{\Phi} = FL/\hbar \quad (10)$$

という形に書き直せる。ただし、 $A_{MM'} \equiv \frac{i\hbar}{E_M - E_{M'}} \langle M | \frac{\partial H(\Phi)}{\partial \Phi} | M' \rangle$  はエネルギー準位間に働く力である。右辺第一項は時間発展の中で獲得する動的位相 (dynamical phase factor) を表し、第二項が無視できる場合には、各々の状態  $a_M(t)$  は独立に時間発展する。(a) エネルギー準位が接近する (擬交叉)、そして、(b)

電場  $F$  が大きい場合、には第二項の影響が顕著になる。その場合には異なる準位同士の干渉効果、非断熱遷移 (トンネル効果) が重要になってくる。

**2 準位系と Landau-Zener 理論** 二準位系の準位擬交叉における非断熱遷移は 1932 に Landau, Zener, Stückelberg (LZS) によって解析された [11, 12, 13]。次の  $2 \times 2$  行列で表現されるハミルトニアン、

$$H(t) = \begin{pmatrix} E_0 - \nu t & \Delta \\ \Delta & -E_0 + \nu t \end{pmatrix} \quad (11)$$

による時間発展を考えた場合、時間推進行列  $U = \hat{T}e^{-i \int_0^T H(t) dt}$  は次の形になる、

$$U = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - p_{LZS}} e^{i\gamma} & \sqrt{p_{LZS}} e^{i\phi} \\ \sqrt{p_{LZS}} e^{-i\phi} & -\sqrt{1 - p_{LZS}} e^{-i\gamma} \end{pmatrix} \quad (12)$$

ここで、 $\gamma, \phi$  は Stokes、動的位相であり、遷移確率  $p_{LZS}$  は次の式で与えられる。

$$p_{LZS} = \exp(-\pi(\Delta)^2/2\nu\hbar), \quad (13)$$

無次元量  $2\nu\hbar/(\Delta)^2$  は非断熱性の度合いを表し、これが大きいと  $p_{LZS} \rightarrow 1$  となり擬交叉を飛び越えるトンネル現象が起きる。

多準位系の場合でも、各交叉が十分離れていれば二準位交叉の繰り返しとして時間発展を考えることが出来る (図 7)。また、多準位系に Landau-Zener 理論を拡張する試みも存在する [14]。

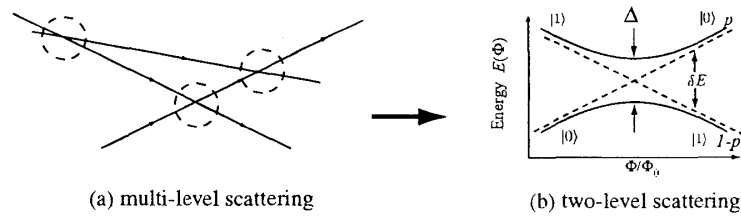


Figure 7: (a) 多準位系の散乱過程 (b) 二準位の散乱過程

### 3.3 多体 Zener 機構による絶縁破壊

一次元 Hubbard モデルの絶縁破壊は多体 Zener 機構 (many-body Zener mechanism) で説明できる [4]。Zener 機構とはバンド絶縁体の静電破壊のメカニズムとして 1934 に Zener が提案したものである [15]。量子非断熱遷移によりエネルギー準位のギャップを飛び越える励起が生じ、電子正孔対が生成される。

Mott 絶縁体の場合、電子相関という多体効果のためにギャップが生成するので、Zener 機構は多体の波動関数のエネルギー準位に対して適用される。前節 (図 3) で見たように電子間反発  $U$  の効果で、Hubbard モデルの断熱スペクトルは至る所で準位擬交叉を起こす。残念ながら全ての準位擬交叉を扱うのは難しい。ここでは次のように段階的に非断熱遷移を取り込むことを考える。

**step 0 ; ボソン化** 多体 Zener 機構を議論するには励起状態の情報が必要である。一次元電子系の電荷の自由度を表現する朝永=Luttinger モデルは励起状態が  $\hat{u}(1)$  の共形タワー構造を構成し、断熱スペクトルが既知である。ウムクラップ散乱によるギャップの生成を取り込むことを考える<sup>3</sup>。

**step 1 ; one-gap model** 最も下のギャップのみを取り扱い、上のギャップは閉じているとする。これはバンド絶縁体の状況と等価である。臨界電場  $\bar{F}$  を評価するのに有効。

**step 2 ; multi-gap model** (図 9(b)) 励起状態  $|0, 2M; \{n_i\}, \{\bar{n}_i\}\rangle$  のうち、フォノン型励起  $n_i, \bar{n}_i$  を取り去った部分 Hilbert 空間  $|0, 2M\rangle$  に制限する。多体 Zener 破壊を論じる上でのミニマルモデル。類似のモデルが disorder 系の散逸効果を調べる過程で提案されており、干渉効果による Ohm 則が数値的に確認されている [16]。

**step 3 ; multi-gap model+散逸項** step 2 で無視したフォノン型励起は新たな散逸の原因となり、熱雑音と類似の手法を用いて取り込む必要がある。二準位系の場合は [17] などがあるが、多体問題の場合は難しい。

<sup>3</sup>ボソンモデルは IR 不安定である。熱力学極限を取る時には注意が必要。

### 3.3.1 ボソン化

一次元 Hubbard モデルの低エネルギー励起はスピンと電荷の自由度が分離し、各々はコンパクト化された自由ボソンモデル ( $c=1$  CFT) を用いて表現される。特に half-filled では、ウムクラップ散乱のため、電荷の自由度は次の sine-Gordon モデルによって表現される。

$$H_\rho(\Phi) = H_{TL}(\Phi) + H^U \quad (14)$$

ただし、自由ボソン部分 (Tomonaga-Luttinger Hamiltonian) は

$$H_{TL}(\Phi) = \frac{2\pi v_\rho}{L} (L_0 + \bar{L}_0 + R \frac{\Phi}{2\pi} J_0 - R \frac{\Phi}{2\pi} \bar{J}_0 + R^2 \frac{\Phi^2}{4\pi^2}) \quad (15)$$

$$= \frac{2\pi v_\rho}{L} \left( \frac{1}{2} (J_0 + R \frac{\Phi}{2\pi})^2 + \frac{1}{2} (\bar{J}_0 - R \frac{\Phi}{2\pi})^2 + (\text{bosonic excitation}) \right) \quad (16)$$

のように平方完成されたものとなる (菅原形式)。自由ボソンの Virasoro、 $u(1)$  カレントはそれぞれ  $T(z) = \frac{1}{2} \partial\varphi(z)\partial\varphi(z)$ ,  $J(z) = i\partial\varphi(z)$  で与えられる。 $R$  はコンパクト化半径である;  $\varphi \sim \varphi + 2\pi R$ 。また、相互作用項 (ウムクラップ散乱) は

$$H^U = g \int_0^L \frac{dx}{2\pi} \cos(2\varphi(x, t)/R), \quad (17)$$

で与えられ、自由ボソンの基底  $|e, m; \{n_i\}, \{\bar{n}_i\}\rangle$  に対しては、

$$\langle 0, 2M+2; \{n_i\}, \{\bar{n}_j\} | H^U | 0, 2M; \{m_i\}, \{\bar{m}_j\} \rangle \neq 0$$

のように行列要素を持つ ( $\sum n_i - \sum \bar{n}_i = \sum m_i - \sum \bar{m}_i$ )。量子数  $m$  は系の全電流と  $J = 2\pi Dm$  のように関係しているのでウムクラップ散乱は系の運動量保存則を (逆格子ベクトルの定数倍だけ) 破っていることが分かる。

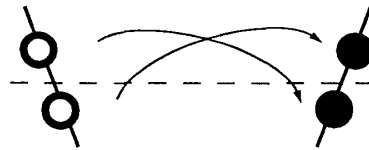


Figure 8: ウムクラップ (Umklapp) 散乱。左右のフェルミ点の間を電子のペアが移動する。全運動量に変化する。

自由ボソンの断熱スペクトルは  $H_{TL}(\Phi)$  から厳密に求まるため、小数系に限定されてしまう数値計算の結果を理解する上で役に立つ。図 9(a) にボソンモデルの断熱スペクトル (の一部) を与える。Hubbard モデルの断熱スペクトルと同様に、ウムクラップ散乱 (17) のためにギャップが開く。Kohn の判定条件で見たように、輸送を考察する上で特に重要なのが基底状態と励起状態との間にあるギャップである (一番下のマル)。この励起状態は *excited state with 2 complex wave number* と呼ばれる状態であり、熱力学極限でギャップの大きさは Mott ギャップ  $\Delta = U - 4t[1 - \int_0^\infty \frac{J_1(\omega)e^{-\omega U/4}}{\omega \cosh \omega U/4} d\omega]$  に漸近する。

### 3.3.2 時間発展の転送行列表示

励起状態の Hilbert 空間をプライマリ状態<sup>4</sup>  $|0, 2M\rangle$  に制限すると、つぎの  $2 \times 2$  ユニタリ行列

$$U_l = \begin{pmatrix} \sqrt{1-p_l} e^{i\gamma_l} & \sqrt{p_l} e^{i\phi_l} \\ \sqrt{p_l} e^{-i\phi_l} & -\sqrt{1-p_l} e^{-i\gamma_l} \end{pmatrix} \quad (18)$$

の組を用いて系の時間発展を記述することが出来る。ここで、遷移確率  $p_l$  は LZS 公式を用いて

$$p_l = \exp\left(-\pi \frac{\bar{F}_l}{F}\right), \quad \bar{F}_l \equiv \frac{\Delta_l^2}{D_{TLal}}. \quad (19)$$

<sup>4</sup> $|0, 2M\rangle$  は Fermi 面が  $M$  だけシフトした状態を表す。

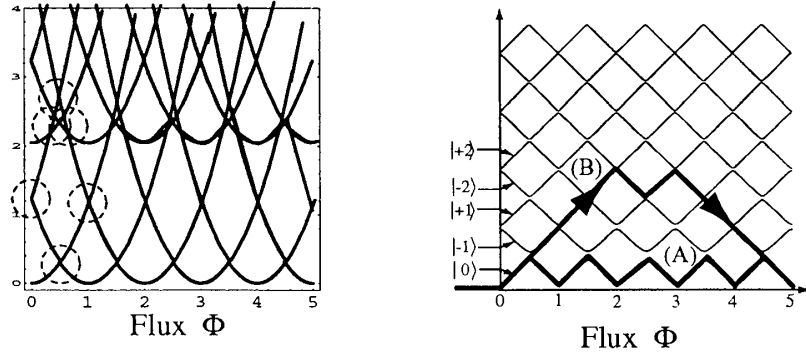


Figure 9: (a) ボソンモデルの断熱スペクトル。ヒルベルト空間は  $|0, 2M; \{n_i\}, \{\bar{n}_i\}\rangle$  に限定している。準位反発による非断熱遷移がおきる。(その一部に丸をつけた) (b) multi-gap モデル。  $M$  pair solutions に相当する  $|M\rangle \equiv |0, 2M\rangle$  に Hilbert 空間を制限。時間発展は各頂点で  $2 \times 2$  のユニタリ行列 (18) をかけることによって行われる。(A),(B) のように異なる経路同士が合流する時、位相干渉が起きる。その結果、ユニタリな時間発展であるにもかかわらず散逸が起きる。

によって与えられる [7]。  $\Phi = n + 1/4, n + 3/4$  における基底で状態を展開すると、  $|\psi((n + 1/4)\Delta t)\rangle = \sum_M A_M^n |M\rangle_{1/4}$ ,  $|\psi((n + 3/4)\Delta t)\rangle = \sum_M B_M^n |M\rangle_{3/4}$ 、時間発展は  $U_l$  を係数  $A_M^n$ ,  $B_M^n$  に作用することによって行われる。

$$\begin{pmatrix} B_{-M}^n \\ B_{M-1}^n \end{pmatrix} = U_{2M-1} \begin{pmatrix} A_{M-1}^{n-1} \\ A_{-M}^{n-1} \end{pmatrix}, \quad (20)$$

$$\begin{pmatrix} A_{-M}^{n+1} \\ A_M^{n+1} \end{pmatrix} = U_{2M} \begin{pmatrix} B_{M-1}^n \\ B_{-M-1}^n \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$A_0^{n+1} = e^{i\gamma_1} B_{-1}^n, \quad (22)$$

ただし、  $M = 1, 2, \dots$  である。初期状態は  $A_M^0 = \delta_{M0}$  によって与えられる。各  $2 \times 2$  行列  $U_l$  を組み合わせて AB-flux 一単位分の時間発展を表すユニタリ演算子  $U = U_{\text{even}} U_{\text{odd}}$  を定義すれば、時刻  $t = (n + 1/4)\Delta t$ ,  $\Delta t = 2\pi/FL$  における波動関数  $|\Psi(n)\rangle$  は

$$|\Psi(n)\rangle = U^n |0\rangle \quad (23)$$

で与えられる。

この枠組みで計算すべき重要な量として、分布関数<sup>5</sup>  $P_M(n) = |\langle M|U^n|0\rangle|^2$  があり、特に、  $P_0(t) = e^{-2tLW}$  により定義される崩壊率  $W$  は系の局在性を議論する上で役に立つ指標となる。物理量としては電流の期待値  $\langle J(n) \rangle = 4\pi D_{TL} \sum_M M P_M(n)$ 、エネルギーの期待値  $\langle E(n) \rangle = \frac{(2\pi)^2 D_{TL}}{L} \sum_M M^2 P_M(n)$  がある。

### 3.3.3 one-gap model

一番下のギャップ (Mott ギャップ) のみを考え、励起状態間のギャップを無視 ( $p_l = 1$ ,  $l \geq 2$ ) すると計算は自明になる。これは物理的には一次元バンド型絶縁体の Zener 破壊を表す。この時、分布関数は厳密に求まる。

$$P_M(n) = p_1(1 - p_1)^{n-M} \quad \text{for } 1 \leq M \leq n, \quad (24)$$

$$P_0(n) = (1 - p_1)^n, \text{ and else } P_M(n) = 0. \quad (25)$$

これは図 9 において、軌跡が (A) のようなものに一意に限定されるためである。

この時、崩壊率を求めると

$$W = -\frac{F}{4\pi} \log(1 - p_1). \quad (26)$$

となる。実はこれは電場による QED 真空の崩壊率<sup>6</sup> の Schwinger の公式 [18] と一致する。この対応は 2, 3 次元でも成り立つものである [7]。

<sup>5</sup>より一般には確率振幅  $P_{MN}(n) = |\langle M|U^n|N\rangle|^2$  も重要な役割を果たす。

<sup>6</sup>電子正孔対の生成率



### 3.3.4 multi-gap model

リング系の不純物効果を調べるために、類似のモデルが 1980 年代に Gefen, Thouless, Lenstra, Haeringen, Landauer らによって研究された [19, 16, 20, 21]。主に数値的手法を用いて解析され、孤立量子系でユニタリな時間発展をするにもかかわらず、Landau-Zener 遷移によって引き起こされる確率分岐と異なる軌跡同士の位相干渉効果のために、

1.  $\langle E(n) \rangle$  が増加するという、“エネルギー散逸”が起きる [20]
2. 散逸により IV 特性に Ohm 則が成り立つように見える [16]

と報告されている。また、より一般の量子系の断熱スペクトルをランダム行列 (GOE, GUE) で表現し、Ohm 則の成立を議論した Wilkinson [22] の仕事も存在する。

最後に筆者の行った数値計算の結果を紹介する。転送行列表示 (22) に基づいて計算する。各ギャップにおける遷移確率  $p_l$  の分布で結果は大きく異なる。(a) 最低ギャップの見開いた single-gap モデル、(b) 高次のギャップを徐々に通りやすする、(c) 全てのギャップの遷移確率  $p_l$  が等しい、という 3 通りの場合を計算した。

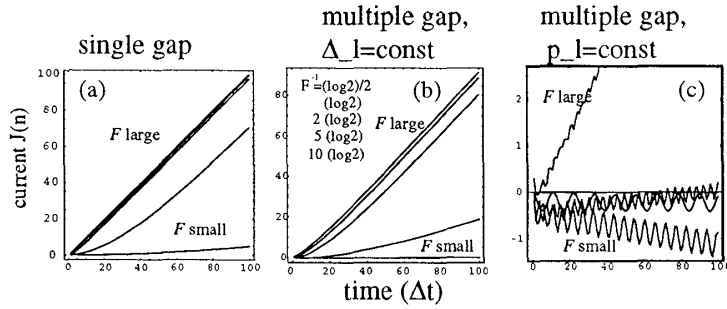


Figure 10: 電流値の時間変化。(a),(b) は電流は有る時間がたつと自由電子と同じ時間依存性、 $\langle J(n) \rangle \propto n$  に近づく。一方、(c) では電流値が 0 に近い値で振動する。

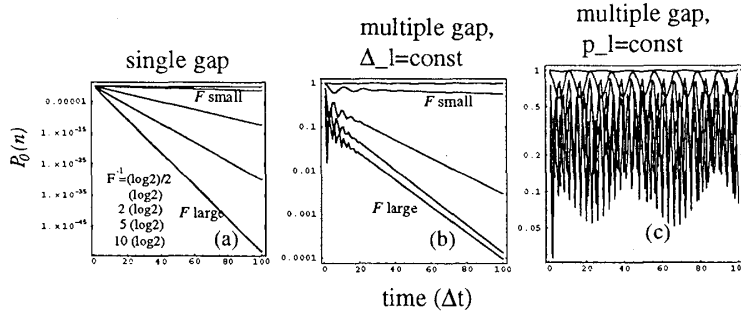


Figure 11: 基底状態の存在確率  $P_0(n)$  の時間発展 (log plot)。(a),(b) では指数関数的に減少するのに対して、(c) では電場に依存した共鳴現象が見える (coherent destruction)。

(a)、(b) では定性的な傾向は同じで、電流は一定の delay time の後に流れ始め、その後は自由電子と似た振る舞いを示す。この場合、電流値が定常値  $\langle J(n) \rangle \sim \text{const.}$  に漸近しない。そして、基底状態の確率は指数関数的に減少する i.e.,

$$|\langle 0|U^n|0 \rangle|^2 \sim e^{-tLW}$$

一方、高次のギャップの効果を大きくしていくと高励起状態の間の散乱 (ギャップ) により、一度励起した状態が再び基底状態に戻ってくる過程 (図 9 の (B) のような軌跡) の効果が顕著になる。そのため基底状態近傍に確率の局在現象が起きると思われる  $|\langle 0|U^n|0 \rangle|^2 \sim n^{-\gamma}$ 。極端な例として、全ての遷移確率  $p_l$  が等しい時、図 11(c) のように、基底状態と第一励起状態の間で共鳴現象が起こり、それ以上高い励起状態へのトンネルが阻害される (図 12)  $|\langle 0|U^n|0 \rangle|^2 \sim \text{oscillation}$ 。

現在より定量的な解析を行っているところであり、結果は別途報告させて頂きたい。

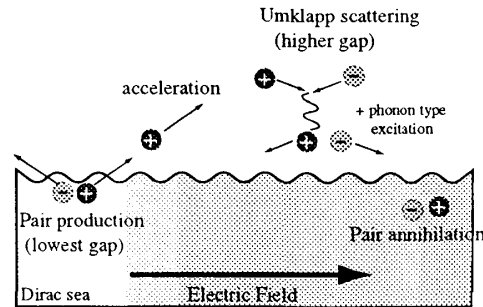


Figure 12: Mott 絶縁体における電子・正孔対の振る舞い (イメージ図... 不正確かも知れない)。最低ギャップを飛び越えて電子正孔対が生成し、電場の中で加速される。しかし、電子は正孔と Umklapp 散乱を起こし、運動量を失う、と同時にフォノン型励起にエネルギーを奪われる。やがて、再びフェルミ面 (Dirac sea) の下で再結合してしまう。

## 4 まとめと今後の課題

Landau-Zener 型遷移は強電場下での輸送問題を考える上で本質的に重要であることが分かった。絶縁破壊の臨界電場  $\bar{F} = \frac{\Delta^2}{D_{TL}a}$  が LZS の公式より求められた。バンド絶縁体と Mott 絶縁体とは、時間発展に本質的な違いがあり、それらが高次の励起状態の間のギャップのためであることが分かった。また、これら高次のギャップによる確率の分岐、位相の干渉効果により、散逸、抵抗が生じることが分かった。

今後の課題としては次が挙げられる。

- 場の理論的方法で真空の崩壊率  $W$  を Umklapp 散乱が存在する時に計算すること。
- multi-gap モデルの振る舞いを解析的に理解する。通常金属の定常状態が実現するかどうかを調べる。緩和時間の実験値との比較。
- 光誘起絶縁破壊への拡張。ac 電場中の久保公式を定式化する試みが最近行われている。光スイッチング等、応用上の観点からも興味深い。

## 5 謝辞

本研究は有田亮太郎氏、青木秀夫先生との共同研究に基づくものである。また、多くの方々に議論、アドバイスを頂きました。この場を借りて感謝させていただきます。

## References

- [1] Y.Taguchi T.Matsumoto and Y.Tokura. *Phys. Rev. B*, 62:7015, 2000.
- [2] R.G.Mani J.H. Smet K. von Klitzing V. Narayanamurti W.B.Johnson and V.Umansky. *Nature*, 420:646, 2002.
- [3] Elliott H. Lieb and F. Y. Wu. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Phys. Rev. Lett*, 21:192, 1968.
- [4] T.Oka R.Arita and H.Aoki. Breakdown of a Mott insulator – non-adiabatic tunneling mechanism. *Phys.Rev.Lett.*, 91:66406, 2003.
- [5] T. Fukui and N. Kawakami. *Phys. Rev. B*, 58:1651, 1998.
- [6] T. Deguchi R. Yue and K. Kusakabe. A gapless charge mode induced by the boundary states in the half-filled Hubbard open chain. *J. Phys. A: Gen. Math*, 31:7315, 1998.
- [7] *in preparation.*
- [8] W.Kohn. *Phys.Rev.A*, 133:171, 1963.
- [9] F.Woynarovich. Excitations with complex wavenumbers in a Hubbard chain: I. States with one pair of complex wavenumbers. *J.Phys.C*, 15:85, 1982.
- [10] T.Ogasawara M.Ashida N.Motoyama H.Eisaki S.Uchida Y.Tokura H.Gosh A.Shukla S.Mazumdar and M.Kuwata-Gonokami. Ultrafast optical nonlinearity in the quasi-one-dimensional Mott insulator  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$ . *Phys. Rev. Lett.*, 85:2204, 2000.
- [11] L.D.Landau. *Phys.Z.Sowjetunion*, 2:46, 1932.
- [12] C.Zener. *Proc. R. Soc. London. Ser. A*, 137:696, 1932.
- [13] E.C.G.Stückelberg. *Helv. Phys. Acta*, 5:369, 1932.
- [14] A.V. Shytov. Landau-Zener transitions in a multilevel system. an exact result. *cond-mat/0301211*.
- [15] C.Zener. *Proc. Roy. Soc. A*, 145:523, 1934.
- [16] D. Lenstra and W. van Haeringen. Elastic scattering in a normal-metal loop causing resistive electronic behavior. *Phys. Rev. Lett.*, 57:1623, 1986.
- [17] Y. Kayanuma. Stochastic theory for nonadiabatic level crossing with fluctuating off-diagonal coupling. *J.P.S.J.*, 54:2037, 1985.
- [18] J. Schwinger. On gauge invariance and vacuum polarization. *Phys. Rev.*, 82:664, 1951.
- [19] D. Lenstra and W. van Haeringen. On the problem of dc conductivity at  $t=0$  in a one-dimensional system of finite length: calculation of the scattering rate in case of weak disorder. *J. Phys. C*, 14:5293, 1981.
- [20] Y. Gefen and D. J. Thouless. Zener transitions and energy dissipation in small driven systems. *Phys. Rev. Lett.*, 59:1752, 1987.
- [21] R. Landauer. Zener tunneling and dissipation in small loops. *Phys.Rev.Lett.*, 33:6497, 1985.
- [22] M. Wilkinson. Statistical aspects of dissipation by Landau-Zener transitions. *J.Phys.A*, 21:4021, 1988.